GridMol 使用说明

一、新建一个分子

1．点击“文件”菜单中的“新建”或直接点“新建”图标 （图 1，图 2）。

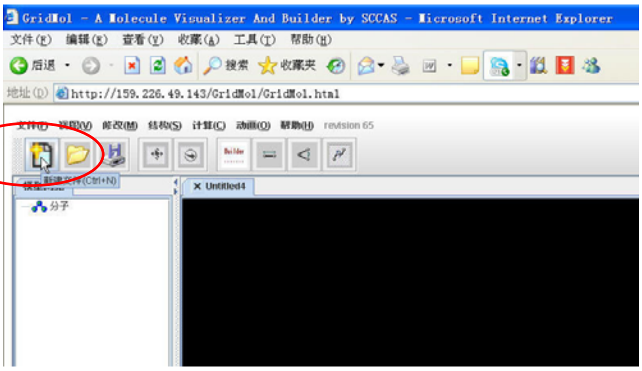

图 1

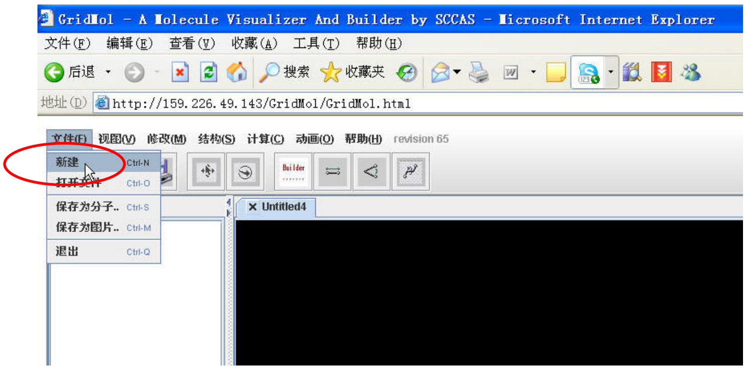

图 2

2．点击 Builder 图标弹出基团菜单（图 3）。

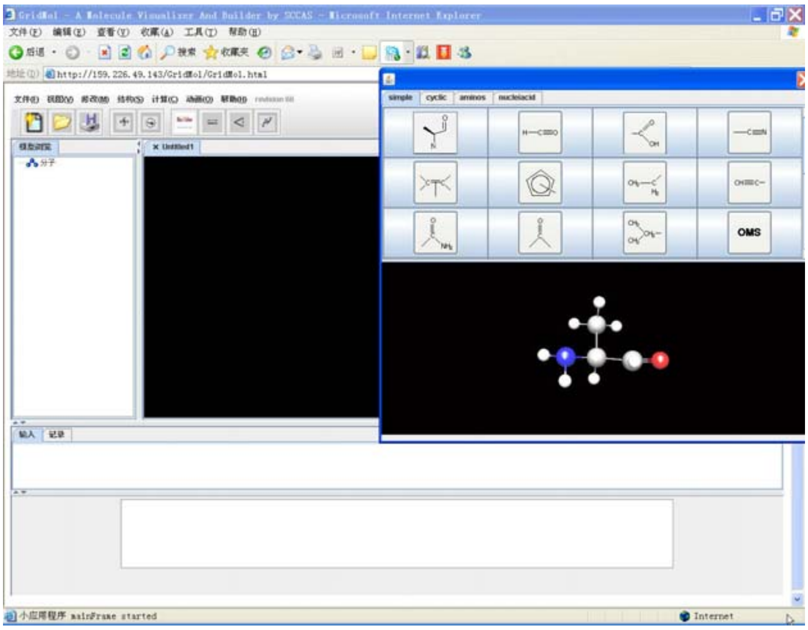

图 3

3．选取所需要的基团并点击它，关闭弹出菜单后，点击“视图”菜单中的“置中”命令（图 4）。

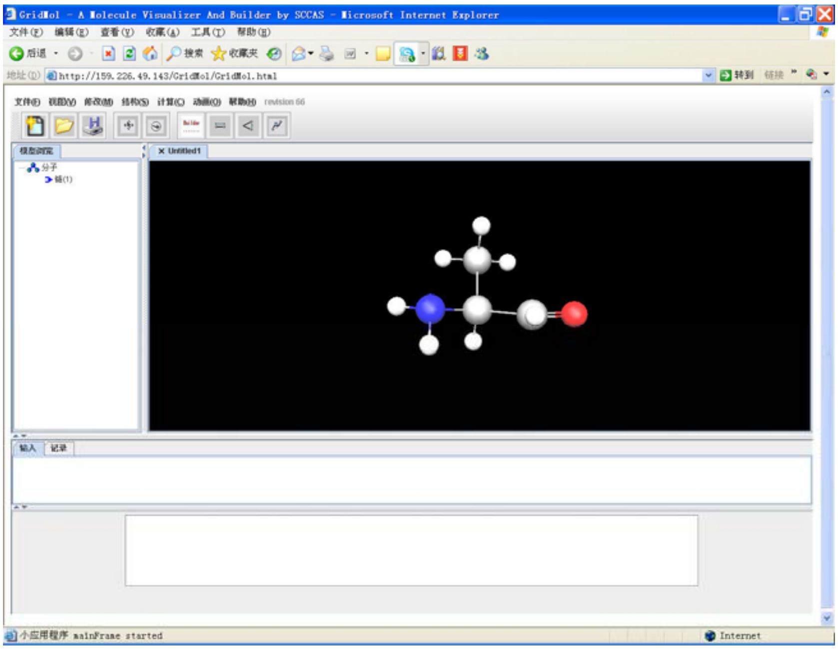

图 4

4．选中（原子/原子对/原子簇）使用“修改”菜单中的命令修改键长、键角、二面角等参数，或是用元素周期表增添新的原子。

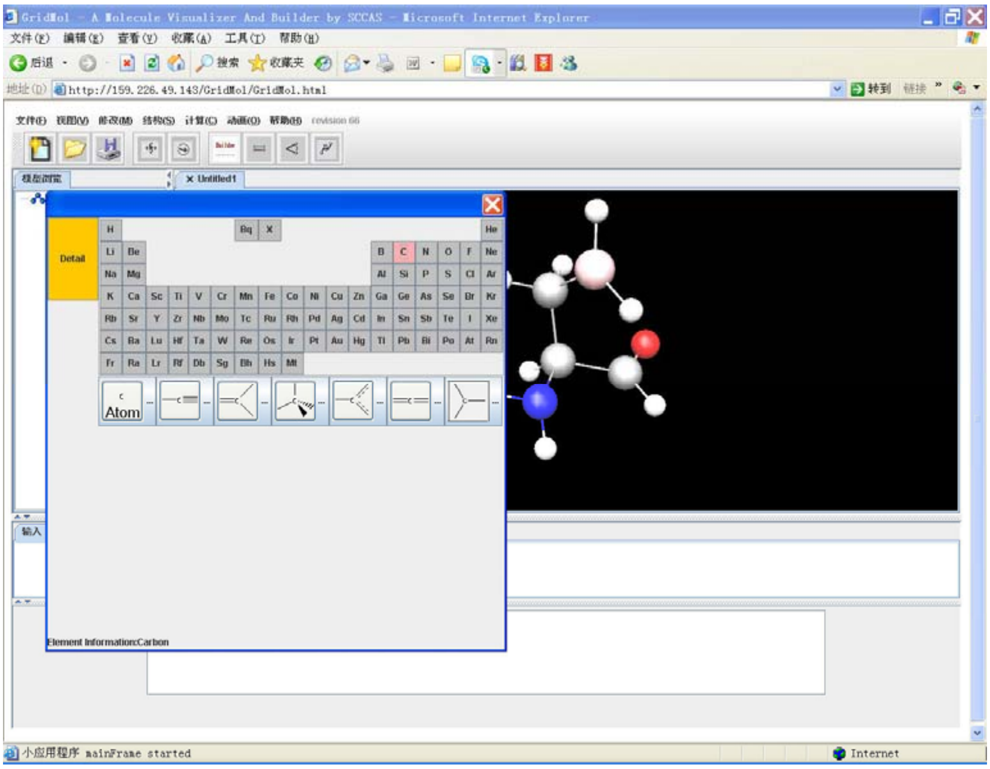

图 5

5．点击“文件”菜单中“保存为分子”将构建的分子存为坐标文件；点击“保存为图片”将构建的分子存为图片文件。

二、显示已有分子坐标文件

以 pdb 文件为例，

1．点击“文件”→“打开”→“浏览”，在弹出的对话框中输入文件所在的路径（本地）或是网络链接（远程）及文件名或直接点中文件，点击“打开文件），显示文件如图 6。

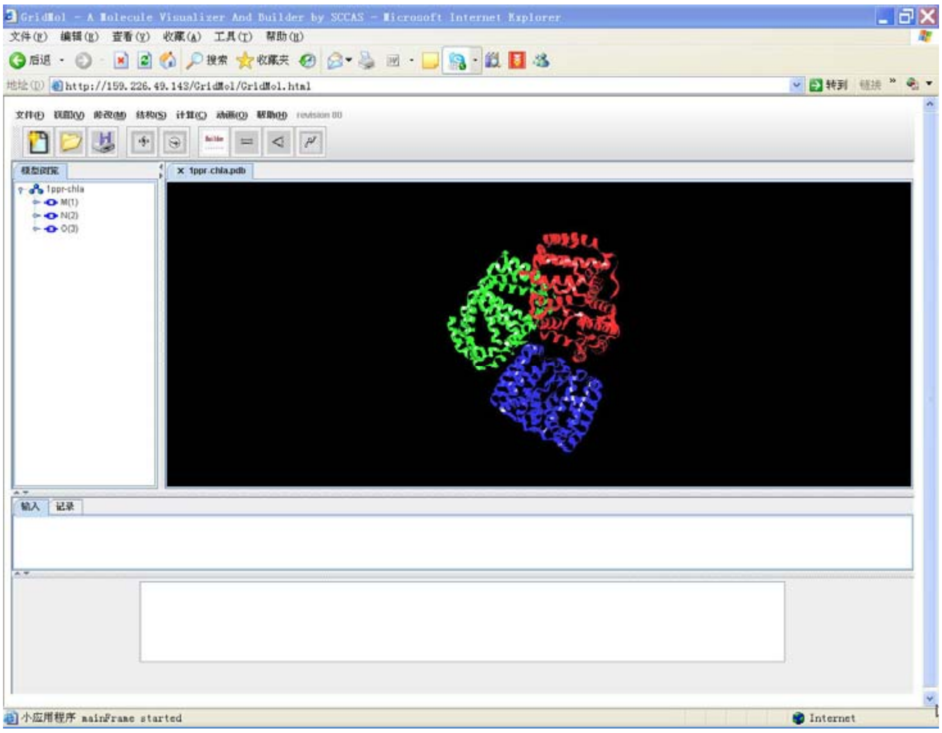

图 6

2．使用“视图”→“显示模式”修改蛋白质的显示方式，满足不同研究的需要（图 7）。

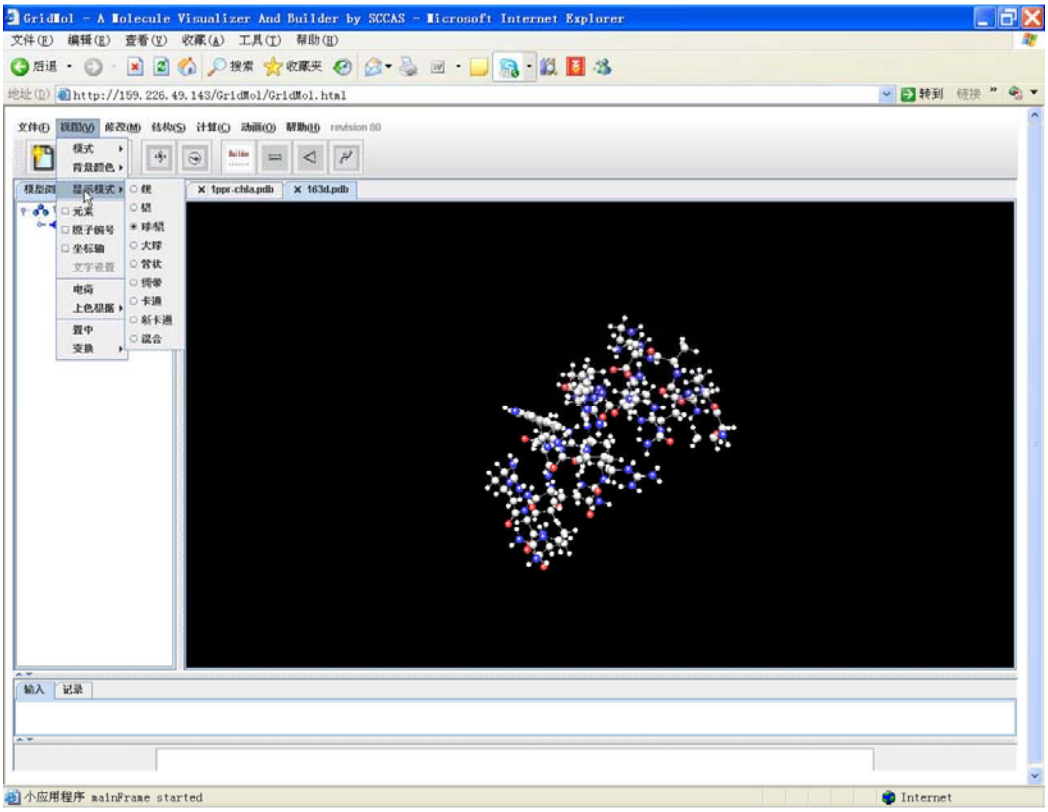
GridMol - A Molecule Visualizer And Builder by SCCAS - Microsoft Internet Explorer
文件(F) 编辑(E) 查看(V) 收藏(A) 工具(T) 帮助(H)
后退 搜索 收藏夹
地址(D) http://159.226.49.143/GridMol/GridMol.html
转到 链接
文件(F) 视图(V) 修改(M) 结构(S) 计算(C) 动画(O) 帮助(H) revision 80
模式
背景颜色
显示模式
元素
原子编号
坐标轴
文字设置
电荷
上色根据
置中
变换
线
棍
球棍
大球
管状
飘带
卡通
新卡通
混合
1ppr-chla.pdb
163d.pdb
输入 记录
小应用程序 mainFrame started
Internet

图 7